



## VII МЕЖДУНАРОДНАЯ ЕЖЕГОДНАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**Роль методов физико-химического исследования  
при установлении приема алкоголя,  
новых наркотических и психоактивных веществ  
в системе взаимодействия экспертных лабораторий  
правоохранительных органов, химико-токсикологических  
лабораторий медицинских организаций и судебно-  
химических лабораторий государственных судебно-  
медицинских экспертных учреждений**

09-10 июня 2022 г. Москва



## **Организаторы:**

Институт физической химии и электрохимии  
им. А.Н. Фрумкина РАН (ИФХЭ РАН)

Ассоциация специалистов по судебно-химическому  
и химико-токсикологическому анализу

## **Место проведения:**

г. Москва, Институт физической химии и электрохимии  
им. А.Н. Фрумкина РАН (ИФХЭ РАН),  
по адресу: 119991, г. Москва ГСП-1, Ленинский проспект, 31

**С 06 по 30 июня 2022 года**  
проводилось обучение по дополнительной  
профессиональной программе  
повышения квалификации  
**«Хроматографические и спектральные методы  
химико-токсикологического анализа»**  
Цикл проходил как в формате онлайн,  
так и очно — в ГБУЗ города Москвы  
«Бюро судебно-медицинской экспертизы  
Департамента здравоохранения города Москвы»

## Программа конференции

Время	Докладчик	Должность, место работы	Название доклада
11:00	Приветственное слово		
Буряк Алексей Константинович, чл.-корр. РАН, директор Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН (ИФХЭ РАН)			
Шаборшин Николай Юрьевич, председатель Ассоциации специалистов по химико-токсикологическому и судебно-химическому анализу.			
Первый день конференции 09.06.2022.			
<b>«Российские библиотеки масс-спектров токсикологически значимых веществ. Алгоритмы пополнения, верификации и статуса»,</b>			
11:20-11:40	Буряк Алексей Константинович	чл.-корр. РАН, директор Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН (ИФХЭ РАН)	Информация о результатах заседания межведомственной рабочей группы по формированию российской библиотеки масс-спектров и их метаболитов, состоявшегося 07 апреля 2022 г.
	Савчук Сергей Александрович	д.х.н., АСХТАиСХА	
	Катаев Сергей Сергеевич	Заведующий СХО Бюро СМЭ, Пермь	
11:40-12:00	Шаборшин Николай Юрьевич, Савчук Сергей Александрович	АСХТАиСХА	Юридические аспекты и технические возможности разработки системы библиотек масс-спектров психоактивных веществ и их метаболитов в рамках Ассоциации специалистов по химико-токсикологическому и судебно-химическому анализу. Предложения по формированию рабочей группы.
12:00-13:00	Григорьев Андрей Михайлович	д.х.н., АСХТАиСХА	Отечественные библиотеки масс-спектров для ГХ-МС и ВЭЖХ-МС/МС, состояние проблемы. Возможные методологические подходы к их верификации для получения официального статуса. Кросс-верификация хроматографических и спектральных данных, полученных разными методами.

## Программа конференции

Обед 13:00 – 14:00

14:00-14:20	Шевырин Вадим Анатольевич	к.х.н., Уральский федеральный университет	Возможности применения и распространения библиотеки масс-спектров и хроматографических индексов удерживания EKBDRUGS для идентификации наркотических средств и психотропных веществ
14:20-14:40	Мелентьев Алексей Борисович	к.х.н., Заведующий СХО Бюро СМЭ Челябинск	О проблеме применения и распространения отечественных библиотек масс- спектров
14:40-15:00	Васильев Андрей	разработчик библиотеки масс- спектров для криминалистики rf-des_drug	Опыт регистрации библиотеки масс-спектров
15:00-15:20	Кадочников Олег Петрович Савчук Сергей Александрович	Центр судебно- медицинской экспертизы МЗ Республики Молдова, Кишинев АСХТАиСХА, д.х.н.	Первая версия RTL-ГХ-МС библиотеки масс-спектров стандартов психоактивных веществ с временами удерживания и факторами отклика относительно дифениламина
15:20-16:00	Юрченко Руслан Александрович	ЗАО «БелХард Групп», департамент экспертных систем (АИПСИН), г. Минск	Новые библиотеки масс-спектров психоактивных веществ
16:00-16:20	Кулябина Елена Валерьевна	ВНИИМС	Возможности ВНИИМС по созданию библиотек масс- спектров

Фуршет 19:00

## Программа конференции

### Второй день конференции 10.06.2021.

11:00-11:20	Морозов Юрий Евсеевич	д.м.н., Бюро СМЭ ДЗ г. Москвы	Организация курсов повышения квалификации для сотрудников СХО и ХТЛ на базе Бюро СМЭ ДЗ г. Москвы
11:20-11:40	Вишневский Михаил		Токсины грибов
11:40-12:00	Походня Юрий Георгиевич  Чеховский Павел Владимирович	УЗ «Национальная антидопинговая лаборатория», г. Минск	ВЭЖХ-МС/МС определение токсинов бледной поганки (аматоксинов и фаллотоксинов) в биологических жидкостях.
12:00-12:20	Айгумов Магомед Шапиевич  Савчук Сергей Александрович	Ноябрьский ПНД  АСХТАиСХА	ВЭЖХ-МС/МС (Shimadzu 8050) определение токсинов бледной поганки в образцах грибов и биологических жидкостях.
12:20-12:40	Кузнецов Даниил Витальевич Айгумов Магомед Шапиевич, Савчук Сергей Александрович	Волгоградский ПНД  Ноябрьский ПНД  АСХТАиСХА	ГХ-МС и ВЭЖХ-МС/МС (Shimadzu 8050) определение галлюциногенов мухомора – мускарина и мусцимола в моче
12:40-13:00	Горбунов Александр Юрьевич	ГНИИ ПЭЧ, Санкт- Петербург	Методы ферментативного моделирования биотрансформации ксенобиотиков
Обед 13:00-14:00			
14:00-14:20	Юдина Анастасия Петровна	СХО бюро СМЭ Пенза	Пополнение методов и создание объединённой библиотеки масс- спектров и MRM (ВЭЖХ-МС/МС Shimadzu 8050)
14:20-14:40		БСМЭ ДЗ г.Москвы	Тема уточняется

## Программа конференции

Второй день конференции 10.06.2021.

14:20-14:40	Ризванова Лилия Нажиповна	Заведующая ХТЛ БУ ХМАО-Югры «Нижевартовская психоневрологическа я больница»	Отравления чемеричной водой (случай из практики)
<p>Круглый стол «Возможности современных методов хромато-масс-спектрометрического анализа для исследования сточных вод на наличие психоактивных веществ» Ведущие: Темирдашев Азамат Зауалевич (КубГУ, Краснодар), Уколов Антон Игоревич (ГНИИ ПЭЧ, СПб), Савчук Сергей Александрович (АСХТАиСХА). Григорьев Андрей Михайлович</p>			





С приветственным словом к участникам научно-практической конференции обратился

**Алексей Константинович Буряк**

Доктор химических наук (2000), профессор (2010), директор Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН. Член НСАХ.

Президент Всероссийского масс-спектрометрического общества.

Член редколлегии журнала "Сорбционные и хроматографические процессы".

Председатель секции "Кинетика и динамика обменных процессов" научного совета Российской академии наук по физической химии.







VII ежегодная научно-практическая конференция  
 «Роль методов физико-химического исследования при установлении факта приема алкоголя, новых наркотических и психоактивных веществ в системе взаимодействия экспертных подразделений правоохранительных органов, химико-токсикологических и судебно-химических лабораторий» 9-10 июня 2022 г.

Кулябина Елена Валериевна, к.т.н.  
 начальник лаборатории 009 – метрологического обеспечения биологических и информационных технологий ФГБУ «ВНИИМС»

[kulyabina@vniims.ru](mailto:kulyabina@vniims.ru)

+7 (495) 781 44 13, +7 (916) 543 60 42

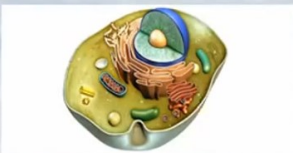
Максим Штаба  
 Катаев Сергей  
 Лаб  
 Лаб  
 Евгения  
 Евгения  
 Выступающий  
 Юрченко Руслан...  
 Юрченко Руслан Александрович



### Рабочие группы по биоанализу Международного бюро мер и весов (BIPM)

Bioanalysis working group (BIPM)

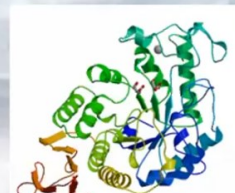
CCQM Working Group on Cell Analysis (CCQM-CAWG)



CCQM Working Group on Nucleic Acid Analysis (CCQM-NAWG)



CCQM Working Group on Protein Analysis (CCQM-PAWG)



Максим Штаба  
 Максим Штаба  
 Катаев Сергей  
 Евгения  
 Евгения  
 Выступающий  
 Юрченко Руслан...  
 Юрченко Руслан Александрович







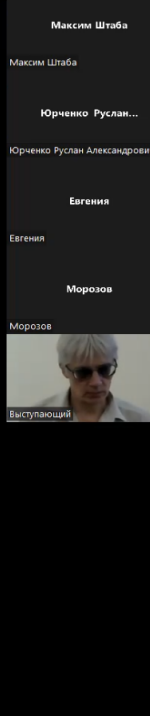
Отечественные библиотеки масс-спектров для ГХ-МС и ВЭЖХ-МС/МС, состояние проблемы. Возможные методологические подходы к их верификации для получения официального статуса. Кросс-верификация хроматографических и спектральных данных, полученных разными методами.

Григорьев  
Андрей  
Михайлович

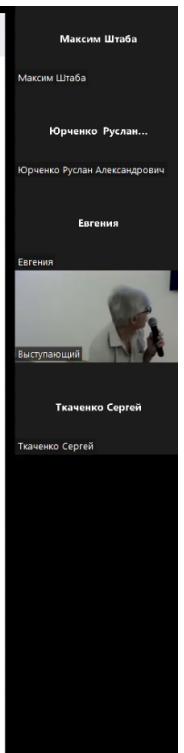
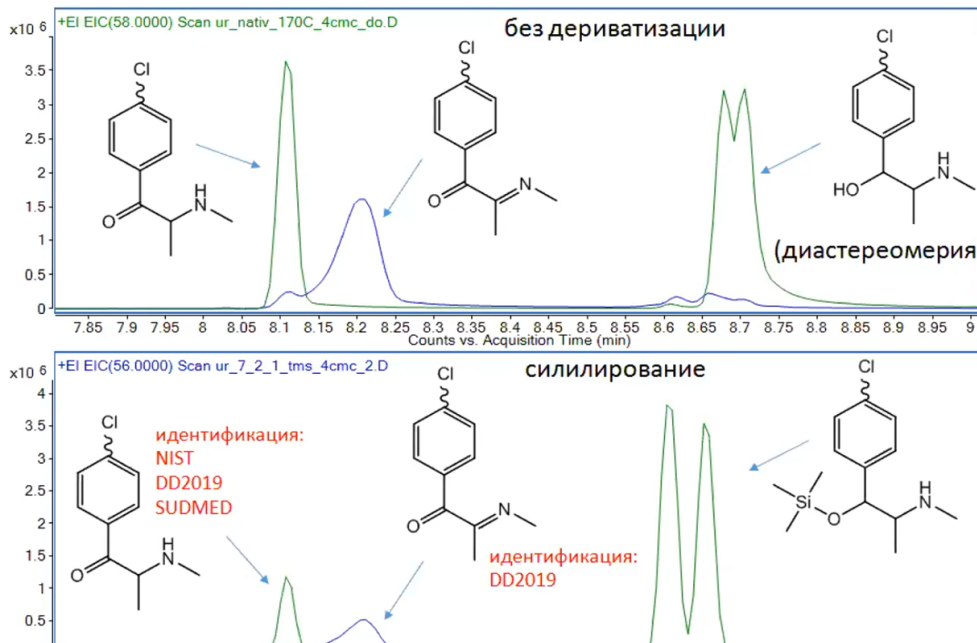
д.х.н., АСХТАиСХА

### Этапы пополнения библиотек на основе анализа аутентичных биообъектов

1. Предполагаемое обнаружение при скрининге ГХ-МС
2. Поиск смежных структур (метаболиты, артефакты и дериваты). Согласование предполагаемых структур и наблюдаемых свойств (химические и биохимические характеристики)
3. Проведение последовательной ЖХ-МС (МС1 – МС3 или МС4) при определении номинальных масс и интерпретация результатов (удерживание, вид кластеров протонированных молекул, анализ последовательной фрагментации)
4. Определение брутто-формул после определения точных масс (ЖХ-МС)
5. Регистрация полученных спектров в поисковых библиотеках с указанием «предполагаемая ХМС идентификация»
6. Ретроспективная обработка ион-хроматограмм биообъектов с целью нивелирования ложной идентификации (матричные соединения)
7. Поиск и анализ биообъектов, содержащих идентифицируемые соединения (не менее 3)
8. Общее согласование результатов
9. Окончательная регистрация спектров в библиотеках с указанием «ХМС



### ГХ-МС: термоллиз и дериватизация







Опыт использования хроматографического и масс-спектрометрического оборудования Shimadzu для решения фундаментальных и прикладных задач на химическом факультете МГУ имени М.В. Ломоносова

И.А. Родин

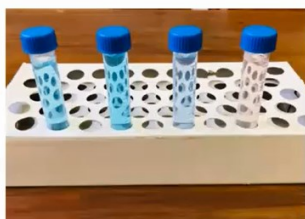
проф., д.х.н.,

зав. лабораторией масс-спектрометрии  
кафедры аналитической химии

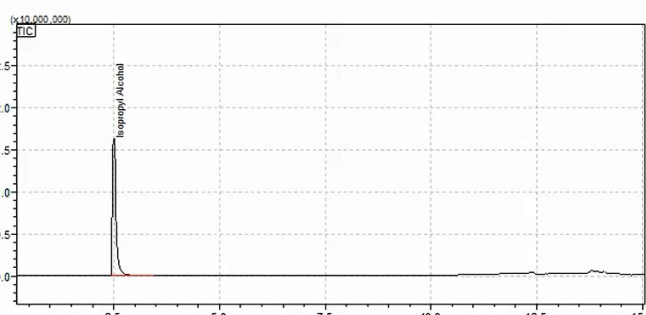
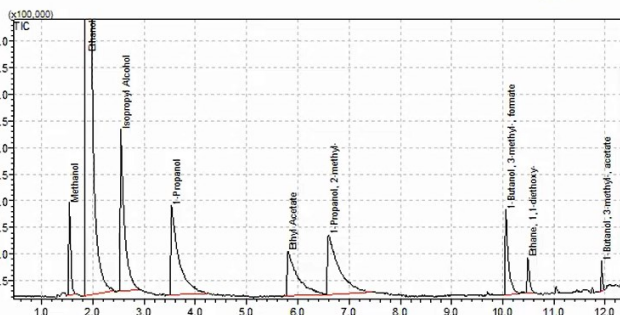
## Совместная лаборатория



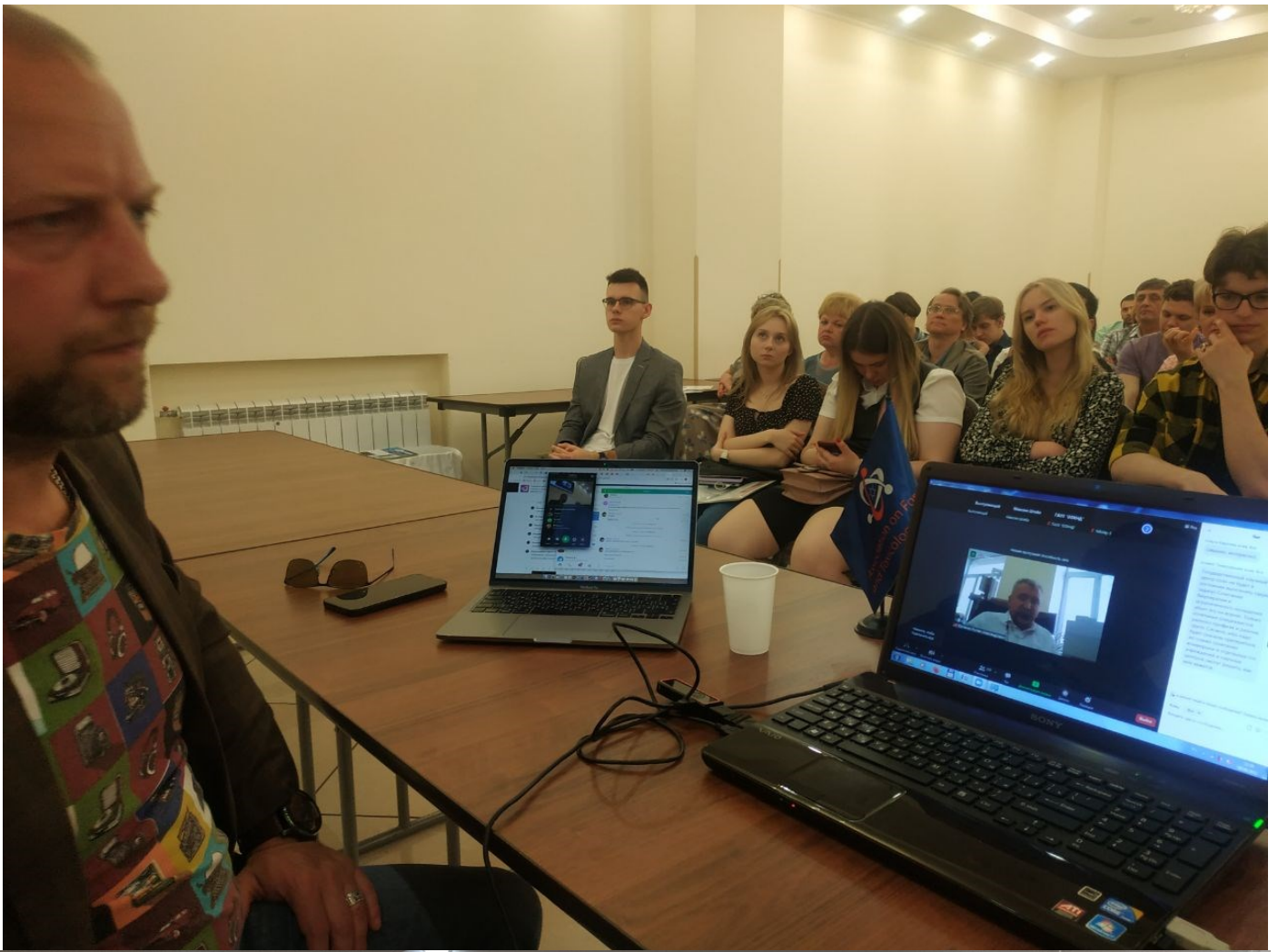
Качественный и количественный анализ состава незамерзающих жидкостей



Газовый хроматомасс-спектрометр GCMS-QP2010 Ultra фирмы Shimadzu (Япония). Приобретен по программе развития МГУ имени М.В. Ломоносова



Масс-хроматограммы двух образцов незамерзающих жидкостей различных производителей







Кадочников Олег  
Петрович

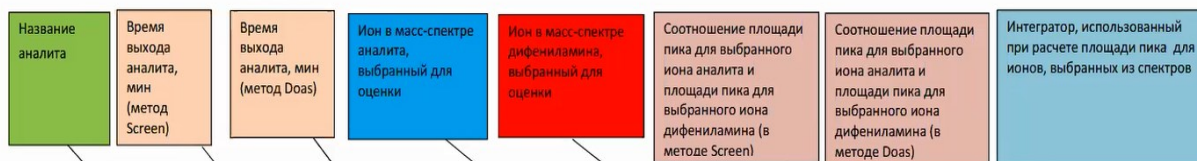
Савчук  
Сергей Александрович

Центр судебно-  
медицинской  
экспертизы МЗ  
Республики Молдова,  
Кишинев  
АСХТАИСХА, д.х.н.

Первая версия RTL-ГХ-МС  
библиотеки масс-спектров  
стандартов психоактивных  
веществ с временами  
удерживания и факторами  
отклика относительно  
дифениламина

Компонент (растворен в ацетонитриле)	Время выхода согласно библиотеке SUDMED, мин		Установленное время выхода, мин		Скорректированное время выхода аналита с учетом эталонного значения времени выхода ДФА, мин (эталонное время выхода ДФА для DOAS - 9,26 мин, для SCREEN - 5,50 мин)		Отношение площади пика иона аналита к площади пика иона внутреннего стандарта (ДФА), полученных при помощи встроенного интегратора программы MSD Chemstation	
	Doas	Screen	Doas	Screen	Doas	Screen	Doas	Screen
Diphenylamine (IS)			9,21	5,50				
2C-B (CAS#: 66142-81-2)			10,82	6,22	10,87	6,22	Ion230:Ion169=0,05	Ion230:Ion169=0,05
Diphenylamine (IS)			9,21	5,52				
Chlorpromazine (CAS#: 50-53-3)	16,06	8,921	15,82	8,83	15,87	8,81	Ion318:Ion169=0,25	Ion318:Ion169=0,25
Diphenylamine (IS)			9,21	5,51				
para-Methoxymethamphetamine			7,53	4,72	7,58	4,71	Ion58:Ion169=1,48	Ion58:Ion169=1,48
Diphenylamine (IS)			9,21	5,51				
Trans-3-Methylfentanyl (CAS#: 42045-86-3)	18,213		17,90	9,90	17,95	9,89	Ion259:Ion169=1,27	Ion259:Ion169=1,27
Diphenylamine (IS)			9,21	5,51				
Methamphetamine (CAS#: 7632-10-2)			5,10	3,53	5,15	3,52	Ion58:Ion169=1,72	Ion58:Ion169=1,72
Diphenylamine (IS)			9,21	5,51				
Dextromethorphan (CAS#: 125-71-3)	13,31		13,28	7,42	13,34	7,41	Ion271:Ion169=0,42	Ion271:Ion169=0,42
Diphenylamine (IS)			9,21	5,52				
Fentanyl (CAS#: 437-38-7)			17,91	9,92	17,96	9,90	Ion245:Ion169=0,75	Ion245:Ion169=0,75
Diphenylamine (IS)			9,21	5,52				
Gabapentin (CAS#: 60142-96-3)			8,86	5,40	8,91	5,38	Ion153:Ion169=0,10	Ion153:Ion169=0,10
Diphenylamine (IS)			9,21	5,51				
Haloperidol (CAS#: 52-86-8)			21,32	11,78	21,37	11,77	Ion224:Ion169=0,14	Ion224:Ion169=0,14
Diphenylamine (IS)			9,20	5,52				
Ketamine (CAS#: 6740-88-1)			11,26	6,47	11,32	6,45	Ion180:Ion169=0,50	Ion180:Ion169=0,50
Diphenylamine (IS)			9,21	5,52				
Meperidine (CAS#: 57-42-1)	10,44		10,36	6,02	10,41	6,00	Ion247:Ion169=0,32	Ion247:Ion169=0,32
Diphenylamine (IS)			9,21	5,51				
N-Desmethyl-cis-tramadol (CAS#: 75377-45-6)	12,2		12,11	6,82	12,16	6,81	Ion188:Ion169=0,41	Ion188:Ion169=0,41
Diphenylamine (IS)			9,20	5,52				
O-Desmethyl-cis-tramadol (CAS#: 144830-14-8)	12,58		12,41	6,98	12,47	6,96	Ion58:Ion169=0,77	Ion58:Ion169=0,77
Diphenylamine (IS)			9,21	5,50				
Tramadol (CAS# 27203-92-5)	12,076		11,90	6,72	11,95	6,72	Ion263:Ion169=0,17	Ion263:Ion169=0,17

Судебно-медицинская экспертиза Молдова, Кишинев, ул. "Победы"



7.6293  
13.8021

Diphenylamine 9.50 min (S) / 9.26 min (D)  
Chlorpromazine 8.81 min (S) / 15.87 min (D) & Analyte Ion (318) : DFA Ion (169) - 0.21(S) / 0.25(D) & Chemstation Integrator

Component:

Purity = 24%  
S/N (total) = 189  
Base Peak = 142040

Match:

Expec. RT = 15.82  
Net = 97  
Weighted = 97

Выступающий

Максим Штаба

Максим Штаба

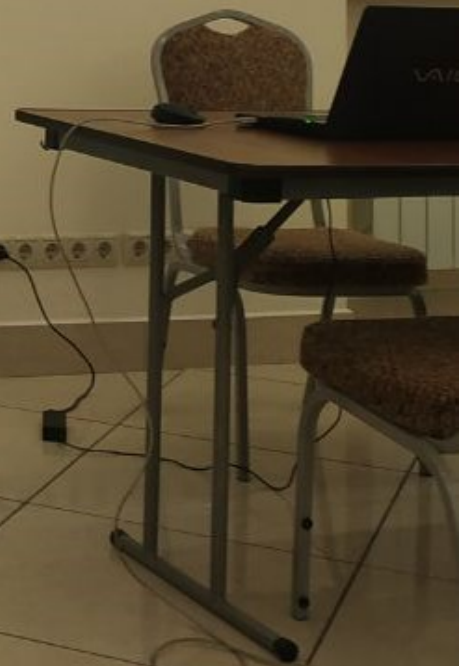
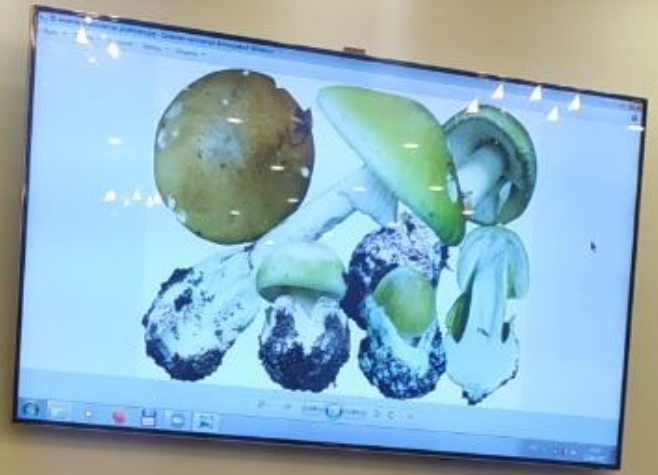
Наиля Халиловна...

Наиля Халиловна Талипова

Юрченко Руслан...

Юрченко Руслан Александрович

Elena Kulyabina





**АМАТОКСИНСОДЕРЖАЩИЕ (ГЕПАТОТОКСИЧНЫЕ)  
ГРИБЫ**

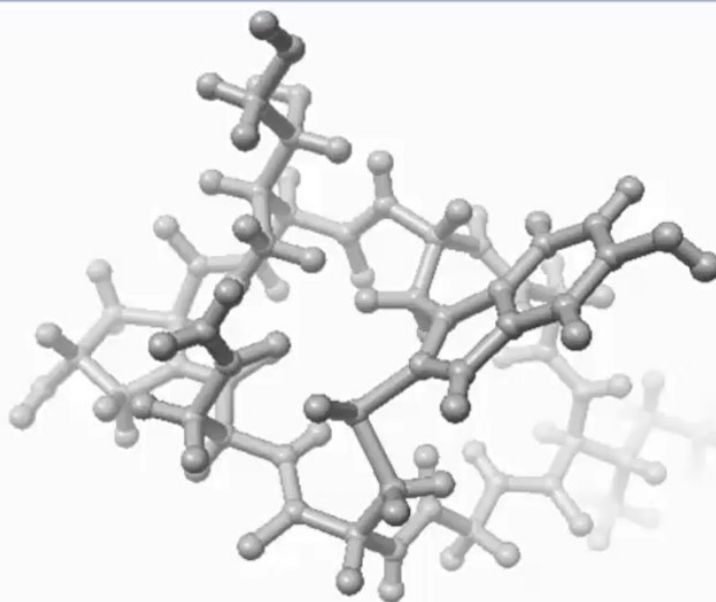
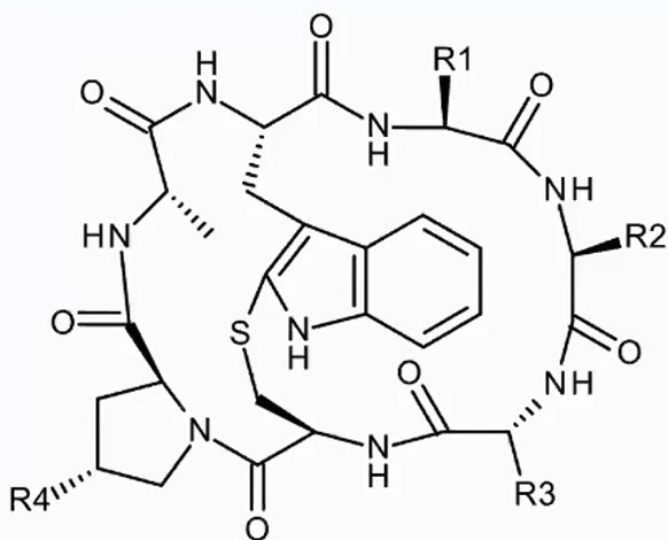
**ВЫСОКОТОКСИЧНЫЕ**

бледная поганка  
мухомор вонючий  
мухомор весенний

**ТОКСИЧНЫЕ**

лепиота коричнево-красная  
галерина окаймлённая

**Летальная доза для взрослого человека  
от 5 до 7 мг (или 25-30 г мякоти)**

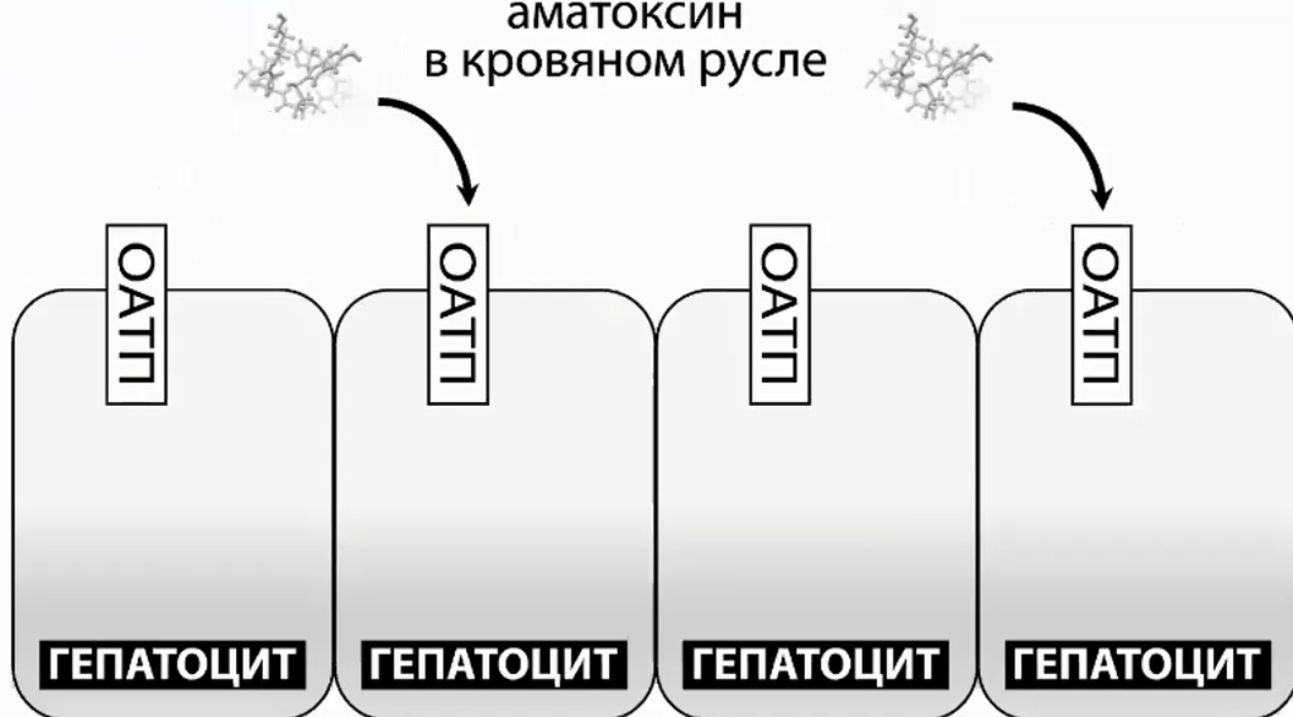


общая химическая  
структура аматоксинов  
с ИНДОЛЬНЫМ «МОСТИКОМ»

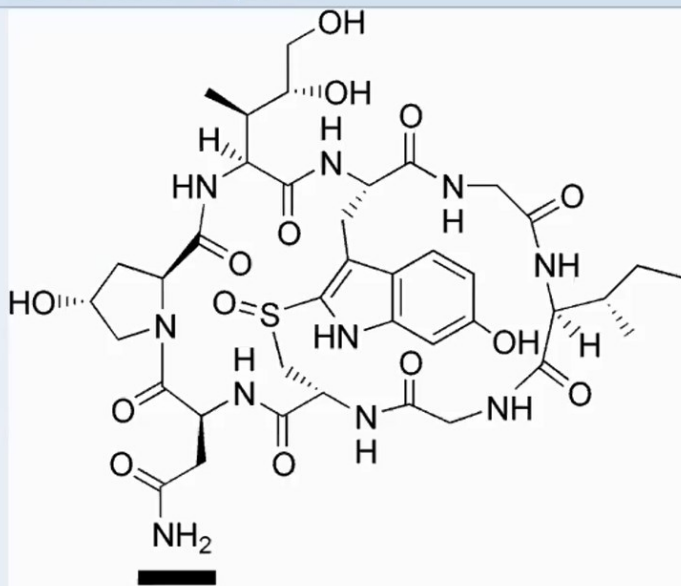
3D-структура  
аманитина



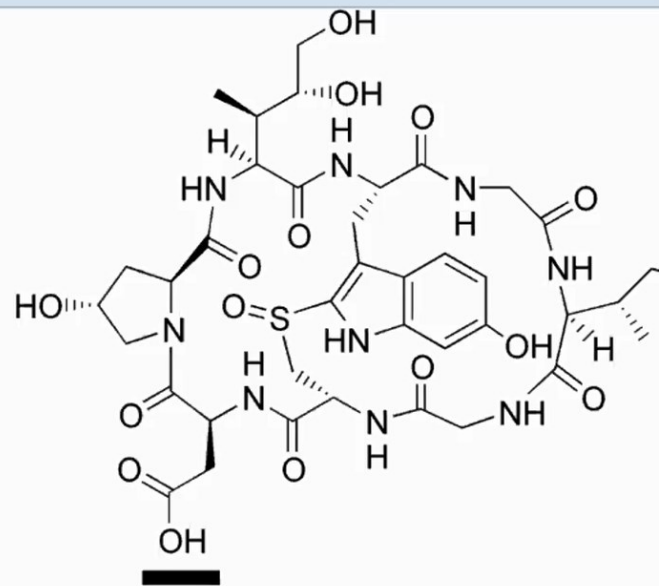
аматоксин  
в кровяном русле



схематическое изображение  
адсорбции аматоксина клетками печени  
через транспортёр OATP  
(органические анион-транспортирующие полипептиды)



**α-аманитин**



**β-аманитин**



## КЛИНИЧЕСКАЯ КАРТИНА ОТРАВЛЕНИЯ АМАТОКСИНАМИ

<b>6–12 часов</b>	скрытый период
<b>13–36 часов</b>	первые «вестники» (ЖКТ-эффекты: тошнота, рвота, диарея, боли в животе, вторичное обезвоживание)
<b>день 2</b>	улучшение самочувствия
<b>день 3–5</b>	развитие гепатотоксичности вплоть до полной печёночной (коагулопатия, кровотечение, энцефалопатия) и почечной недостаточности; бактериальный токсикоз (некроз слизистой кишечника)
<b>день 6–8</b>	летальный исход в случае тяжёлого отравления



МУСЦИМОЛСОДЕРЖАЩИЕ  
(ВОЗДЕЙСТВИЕ НА ЦНС)  
ГРИБЫ

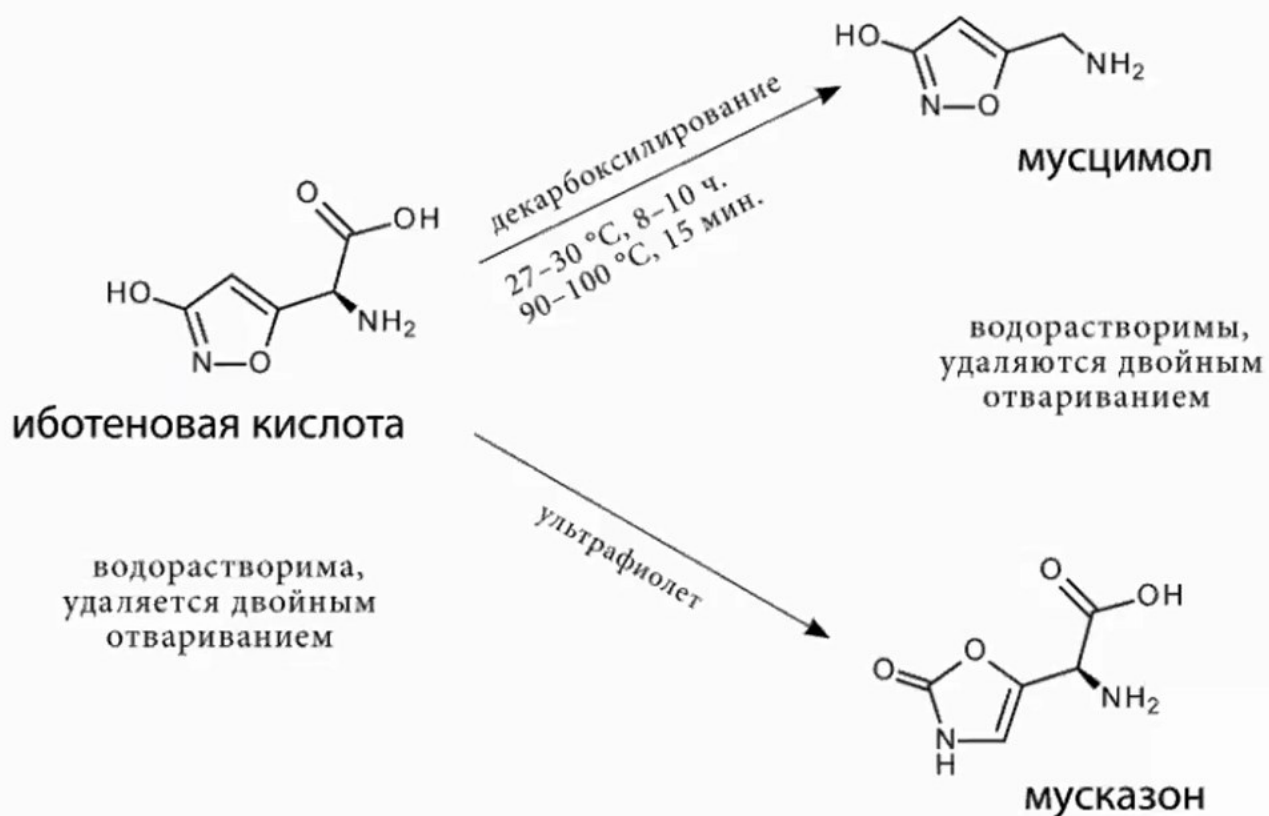
**микоатропиновый  
синдром**

мухомор красный  
мухомор королевский  
мухомор ярко-жёлтый

**пантериновый  
синдром**

мухомор пантерный

# ПРЕВРАЩЕНИЕ ИБОТЕНОВОЙ КИСЛОТЫ В МУСЦИМОЛ







Национальная  
Антидопинговая  
ЛАБОРАТОРИЯ

**ВЭЖХ-МС ОПРЕДЕЛЕНИЕ  
ТОКСИНОВ ГРИБОВ РОДА AMANITA  
(АМАНИТИНОВ И ФАЛЛОДИНОВ) В  
БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ  
ЧЕЛОВЕКА**

Шостак Юрий Георгиевич

Уд. Национальная антидопинговая лаборатория - Республика Беларусь  
220015, Минск, 1000-й километр 5  
e-mail: info@nada.by  
Тел.: +375 29 200 00 00, +375 29 200 00 01  
www.nada.by



Национальная  
Антидопинговая  
ЛАБОРАТОРИЯ

# ВЭЖХ-МС ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОКСИНОВ ГРИБОВ РОДА *AMANITA* (АМАНИТИНОВ И ФАЛЛОИДИНОВ) В БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ ЧЕЛОВЕКА

Походня Юрий Георгиевич

УЗ «Национальная антидопинговая лаборатория» Республики Беларусь

223040, Belarus, Minsk region, Lyasny 31  
e-mail: [info@antidoping.by](mailto:info@antidoping.by)  
Tel.: +375 (17)265 58 88, +375 (17)265 50 40  
Fax: +375 (17)265 50 86, +375(17)265 54 65



## Выполнение анализа



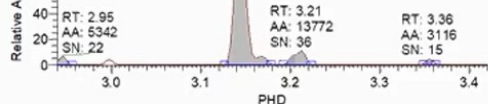
- Хромато-масс-спектрометрический анализ осуществлялся с использованием HPLC-MS системы UPLC-HRMS (Dionex Ultimate 3000, Q Exactive Plus) (Thermo Fisher Scientific, США)
- Работа с прибором и обработка результатов осуществлялась с использованием программного обеспечения Xcalibur.

## Хроматограммы анализируемых соединений в испытуемых образцах (TS)

RT: 2.94 - 3.42 SM: 7G



Хроматограмма образца  
мочи 0910R-20 для PHD



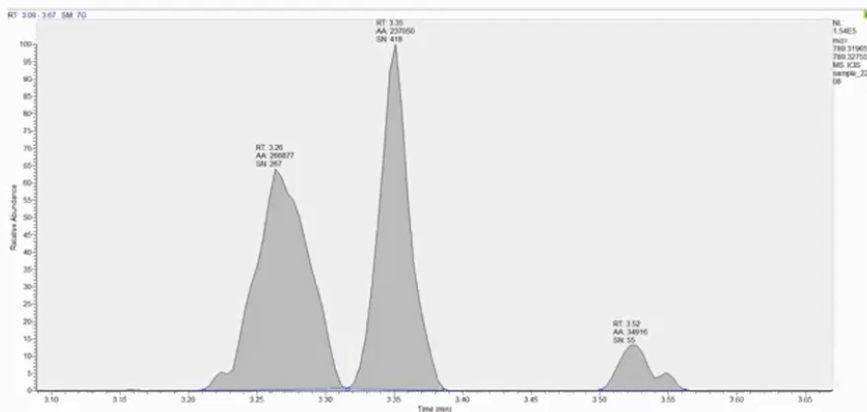
RT: 2.68 - 3.25 SM: 7G



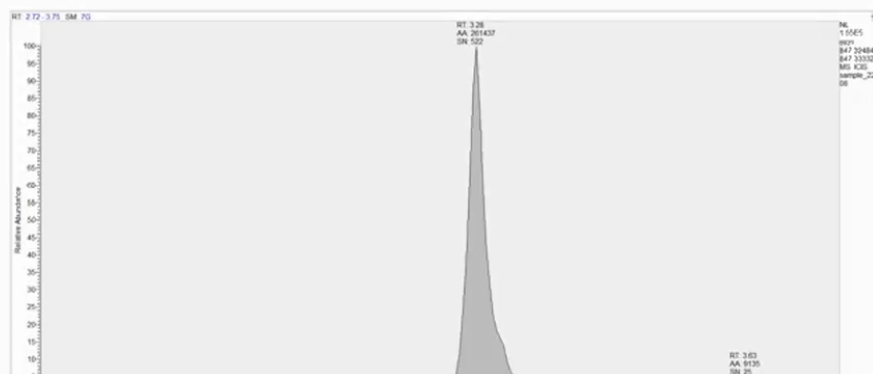
Хроматограмма образца  
мочи 0910R-20 для PHC



## Хроматограммы анализируемых соединений в испытуемых образцах (TS)



Хроматограмма образца  
мочи 2208R-21 для PHD



Хроматограмма образца  
мочи 2208R-21 для PHC



## Перечень детектируемых родительских ионов с характеристическими временами удерживания анализируемых соединений

№	Название соединения (сокращение)	Родительский ион, m/z	RT <sub>exp</sub> , мин
1	α-аманитин (АА)	919,36144	1,09
2	β-аманитин (ВА)	920,34545	0,71
3	Фаллоидин (PHD)	789,32360	3,15
4	Фаллацидин (PHC)	847,32908	2,95









ГБУЗ ЯНАО НОЯБРЬСКИЙ ПНД  
КЛИНИКО-ДИАГНОСТИЧЕСКАЯ ЛАБОРАТОРИЯ

ВЭЖХ-МС/МС (Shimadzu 8050) определение токсинов  
бледной поганки в образцах грибов и биологических  
жидкостях

Описание биологических проб бледной поганки (*Amanita phalloides*)



Образцы шляпок гриба

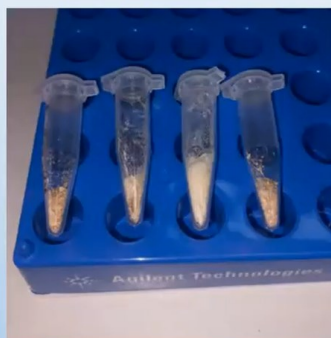


Молодые пло  
гриба



Образцы ножек гриба

Получение экстрактов грибов



Образцы гриба измельчали, взвешивали и помещали в микроцентрифужные пробирки на 1.5 мл, затем добавляли по 1 мл метанола, интенсивно встряхивали на вортексе в течении 5 минут, затем центрифугировали 5 минут при 15 000 об/мин. Верхний слой отбирали и переносили в вials.

Выступающий  
Максим Штаба  
Максим Штаба  
Ольга  
Ольга  
iPhone (Ольга)  
iPhone (Ольга)  
Лилия Ризванова  
Лилия Ризванова



Газ

- Изоли почкы
- рН-9.
- ЖЖЭ н
- ЖЖЭ м
- и Na<sub>2</sub>O
- изопр



Определение эфиров гликоля методом газовой хроматографии – масс - спектрометрии и методом высокоэффективной жидкостной хроматографии тандемной масс – спектрометрии при судебно-химическом исследовании внутренних органов, крови и мочи трупа

Юдина А.П.

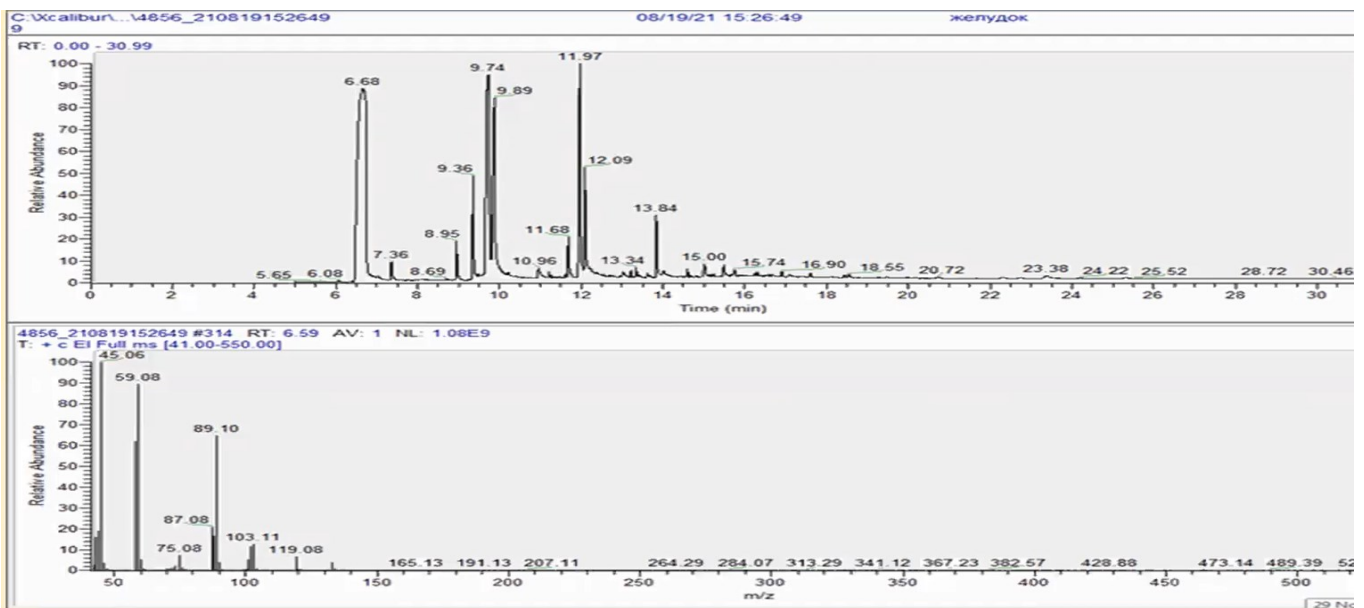


Рис. 1. Хроматограмма образца стенки желудка по полному ионному току

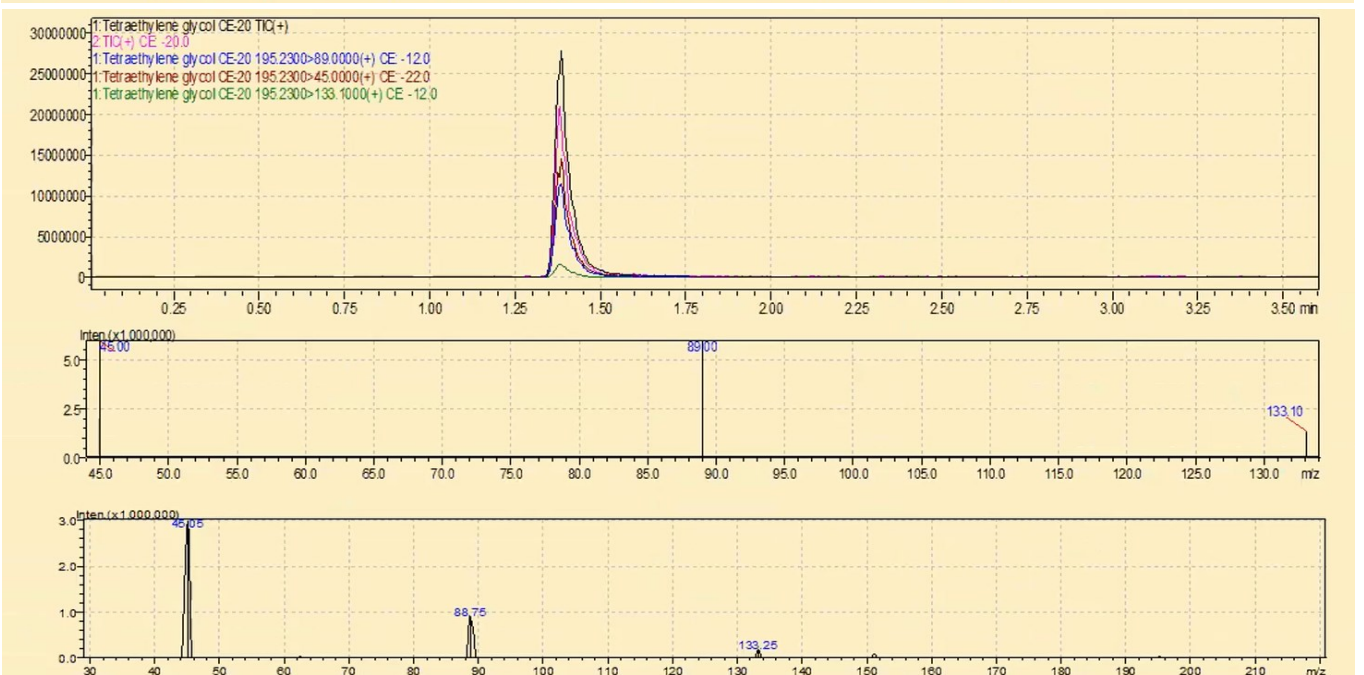


Рис.4. Хроматограмма (колонка Phenomenex Kinetex 2.1mmI.D x 100mmI., 2.6µm, градиентный режим хроматографии) и масс-спектр протонированной молекулы тетраэтиленгликоля в режим



















**Санкт-Петербург 22 июня 2022 года**  
**Семинар и круглый стол (продолжение)**









